

## M 计算物理

分会召集人：赵纪军、刘正猷、龚新高、解士杰、林海青

分会联系人：任晓燕（18538722188）

分会地点：郑州大学主校区北核心教学区 1 号楼 2 层 206 教室（北 1-206）

2019 年 9 月 21 日			
8:30-8:40 分会开幕式			
主持人： 张文清，南方科技大学			
M001	08:40-09:05	杜世萱，中科院物理所（邀请报告）	<b>Computational Design of Functional Nanostructures</b>
M002	09:05-09:30	万贤纲，南京大学（邀请报告）	基于对称性指标预测拓扑材料
M003	09:30-09:55	孙 健，南京大学（邀请报告）	<b>New materials and new states under extreme conditions</b>
M004	09:55-10:07	刘寒雨，吉林大学	Computational design of near room-temperature superconducting materials under pressure via CALYPSO code
10:07-10:25 茶歇			
主持人：杜世萱，中科院物理所			
M005	10:25-10:50	张文清，南方科技大学（邀请报告）	<b>Thermoelectric Transports in the Materials with Chemical Bond</b>
M006	10:50-11:15	张永胜，中国科学院固体物理研究所（邀请报告）	<b>Half-Heusler 材料中的缺陷分布模拟及高通量筛选</b>
M007	11:15-11:40	尹万健，苏州大学（邀请报告）	太阳能材料缺陷的计算研究
M008	11:40-11:52	孙得彦，华东师范大学	Is Disordered Structure the Necessary and Sufficient Condition for Glass Transition
M009	11:52-12:04	王维华，南开大学	基于准二维材料的有效载流子掺杂调控和储能的物理机制
12:00-13:30 午餐&午休			
主持人：何力新，中国科学技术大学			
M010	13:40-14:05	朱骏宜，香港中文大学（邀请报告）	<b>Stability of asymmetric polar or semipolar surfaces and edges</b>
M011	14:05-14:30	陈时友，华东师范大学（邀请报告）	多元低对称性半导体中点缺陷诱导的载流子非辐射复合

M012	14:30-14:55	李贤斌, 吉林大学 (邀请报告)	相变信息存储器的低功耗相变过程计算设计
M013	14:55-15:20	周 健, 西安交通大学 (邀请报告)	光致相变材料的理论设计与计算研究
M014	15:20-15:32	司 晨, 北京航空航天大学	Photoinduced Vacancy Ordering and Phase Transition in MoTe <sub>2</sub>
15:32-15:50 茶歇			
主持人: 朱骏宜, 香港中文大学			
M015	15:50-16:15	何力新, 中国科学技术大学 (邀请报告)	ABACUS 软件中高效杂化密度泛函计算的实现
M016	16:15-16:40	孟 胜, 中科院物理所 (邀请报告)	<b>Manipulating quantum states by photoexcitation</b>
M017	16:40-17:05	何朝宇/钟建新, 湘潭大学 (邀请报告)	基于群论图论的晶体结构预测新方法及其应用
M018	17:05-17:30	周愈之, 北京应用物理与计算数学研究所 (邀请报告)	无公度体系量子本征值问题的平面波方法
M019	17:30-17:42	马天星, 北京师范大学	Quantum Monte Carlo Study of the Intermediate Phase in an Interacting Honeycomb Lattice with Staggered Potential
M020	17:42-17:54	付召明, 河南师范大学	瓦尼尔函数在计算材料研究中的若干应用
晚餐			

<b>9 月 22 日</b>			
主持人: 季 威, 中国人民大学			
M021	08:30-08:55	张 平, 北京应用物理与计算数学研究所 (邀请报告)	温稠密物质特性的第一性原理分子动力学研究
M022	08:55-09:20	张立军, 吉林大学 (邀请报告)	<b>Design of functional semiconductors by knowledge-based materials screening</b>
M023	09:20-09:45	李延龄, 江苏师范大学 (邀请报告)	新型层状材料 PS <sub>2</sub> 的理论和实验研究
M024	09:45-09:57	董 校, 南开大学	高压下的碳酸盐

M025	09:57-10:09	朱志立, 郑州大学	Strain in van der Waals epitaxy and evidence of collective macroscopic effect of a negligibly small perturbation
10:09-10:30 茶歇			
主持人: 张平, 北京应用物理与计算数学研究所			
M026	10:30-10:55	季威, 中国人民大学 (邀请报告)	Emerging electronic states in van der Waals hetero-bilayers
M027	10:55-11:20	黄兵, 北京计算科学研究中心 (邀请报告)	Anomalous Dirac Plasmons in 1D Electrides
M028	11:20-11:45	吴梦昊, 华中科技大学 (邀请报告)	Innovations of 2D Multiferroics
M029	11:45-11:57	郭宇, 大连理工大学	具有优异的抗氧化性和高载流子迁移率的二维半导体
M030	11:57-12:09	舒海波, 中国计量大学	二维过渡金属硫族半导体的缺陷控制与光电特性研究
12:10-13:30 午餐&午休			
主持人: 贾瑜, 郑州大学			
M031	13:40-14:05	邹小龙, 清华-伯克利深圳学院 (邀请报告)	Theoretical studies on excitonic properties of 2D group-IV monochalcogenides
M032	14:05-14:30	李顺方, 郑州大学 (邀请报告)	Synergetic Role of Charge Transfer and Spin Selection in CO Oxidation on Two-Dimensional Half-Metallic Organic Frameworks
M033	14:30-14:55	高琨, 山东大学 (邀请报告)	有机太阳能电池内非均匀场驱动的电荷载分离机制
M034	14:55-15:07	许应瑛, 北京科技大学	催化性能提升与表界面结构调控
M035	15:07-15:19	张帅, 山东大学	具有超长载流子寿命的 MoSSe 纳米管用作光催化剂分解水
15:19-15:40 茶歇			
主持人: 赵纪军 大连理工大学			
M036	15:40-16:05	贾瑜, 郑州大学 (邀请报告)	Metal Oxides Photocatalysis: From Single Molecular to 2D Amorphous Monolayers
M037	16:05-16:30	李晓光, 深圳大学 (邀请报告)	复杂发光系统中的暗激子态

M038	16:30-16:55	李元昌, 北京理工大学 (邀请报告)	Excitonic Insulators in Direct-Gap Solids
M039	16:55-17:20	郭志新, 西安交通大学 (邀请报告)	反铁磁薄膜中的千兆赫兹自旋波传输
M040	17:20-17:32	谢禹, 吉林大学	Computational Crystal Growth of Borophene
M041	17:32-17:44	尹笋, 山东大学	有机发光二极管热活化延迟荧光机制中的激子单三态演化研究
M042	17:44-17:56	秦绪明, 安阳师范学院	矩形二维材料狄拉克锥形成的镜像对称分析
晚餐			

### 墙报

墙报张贴时间: 9月20日 12:00-14:30

优秀墙报评选: 9月20日 14:30-18:00

地点: 郑州大学主校区北核心教学区1号楼2层走廊

编号	姓名、单位	题目
M-P001	陈泉, 中科院固体物理研究所	$\beta$ -PtO <sub>2</sub> : 声子, 热力学, 弹性性质的第一性原理计算
M-P002	潘昌昌, 东南大学	First-principles study on the mechanism of hydrogen adsorption and diffusion in LaFeO <sub>3</sub>
M-P003	程向荣, 河北工业大学	InSe 纳米带提高析氢催化活性的第一原理研究
M-P004	李仁义, 河南师范大学	Effect of toxic ligands on O <sub>2</sub> binding to heme and their toxicity mechanism
M-P005	Qinxi Liu, Dalian University of Technology	Novel mechanical, magnetic and catalytic properties of 2D metallic transition-metal phosphides
M-P006	涂正远, 华中科技大学	蜂窝状单层中的超高可逆应变: 从共价键到金属键
M-P007	JiabinLi, Xiangtan University	First-principles prediction of a new ground state for surface-oxidized phosphorene with remarkable piezoelectricity
M-P008	王学晋, 山东大学	利用DFT探索LaB <sub>6</sub> 声子输运特性及其对材料电热输运性质的影响
M-P009	李媛, 郑州大学	Negative thermal expansion of Prussian blue analogues ScCo(CN) <sub>6</sub> and TiCo(CN) <sub>6</sub> : First-principles study

M-P010	韩立, 山东大学	基于二芳基乙烯分子的可逆分子光开关的合理设计
M-P011	韩天茹, 桂林理工大学	硼、镓、铜掺杂 $\text{Ca}_{12}\text{Al}_{14}\text{O}_{33}$ 的电学性能第一性原理研究
M-P012	宋贤齐, 吉林大学	高压下氨-氢化合物新奇结构
M-P013	薛文明, 湘潭大学	半氢化石墨烯与 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 异质结的第一性原理研究
M-P014	高亚鑫, 华中科技大学	体态和二维卤化银、卤化亚铜中的相变以及多铁性
M-P015	陈芯仪, 江苏师范大学	压力诱导的 $\text{LiP}_{15}$ 的维度变化和超导特性
M-P016	赵逾斌, 郑州大学	Layzer 模型下压缩对 Rayleigh-Taylor 和 Richtmyer-Meshkov 不稳定性的影响
M-P017	Xiujuan Mao, Hebei University of Technology	Biaxial strain induced band transition and valley-spin coupling in the ferromagnetic semiconducting $\text{WSe}_2/\text{1T-FeCl}_2$ heterostructure
M-P018	王家棋, 郑州大学	Long wavelength acoustic modes driven negative thermal expansion in rhombohedral $\text{Zn}_2\text{GeO}_4$ : A first-principles investigation
M-P019	王燕遐, 大连理工大学	$\text{CrB}_2$ 单层的第一性原理研究: 一种新的二维铁磁性半导体
M-P020	邢健沛, 大连理工大学	Strain effect on magnetic transition and magnetic anisotropy energy in 2D two coordinated 5d transition metal
M-P021	Zhenqing Li, Xiangtan University	Few-layer beta-SnSe with Strong Visible Light Absorbance and Ultrahigh Carrier Mobility
M-P022	朱梦红, 南开大学	二维磁性材料设计
M-P023	Shuqing Zhang, Tsinghua Berkeley Shenzhen Institute	Intrinsic Half-Metallicity in 2D Ternary Chalcogenides with High Critical Temperature and Controllable Magnetization Direction
M-P024	NannanLuo, Tsinghua University	Saddle-point Excitons and Their Extraordinary Light Absorption in Two-Dimensional beta-phase Group-IV Monochalcogenides
M-P025	吴灿阁, 郑州大学	多尺度纯排斥相互作用系统动力学特性研究
M-P026	侯晶钰, 南开大学	高压下新型 He-N 组分
M-P027	罗智博, 湖北工业大学	(Ru+N)共掺杂对锐钛矿 $\text{TiO}_2$ 光催化性质的优化理论研究
M-P028	王志杰, 湖北工业大学	直接 Z-Scheme $\text{BC}_3/\text{C}_3\text{N}(\text{BC}_6\text{N})$ 异质结光催化水分解的理论研究
M-P029	杨逗, 陕西师范大学	新型层状 $\text{K}_{0.8}\text{Ni}_{0.4}\text{T}_{1.6}\text{O}_4$ 纳米片: 合成、微观结构和对 MB 的光催化降解
M-P030	Lingling Yu, Shanghai Normal University	Tuning the electronic properties by strain and external electric field in armchair Janus $\text{MSSe}$ ( $\text{M}=\text{Mo}, \text{W}$ ) and $\text{MoSSe}/\text{WSSe}$ superlattice nanoribbon: A First-Principles Study
M-P031	孙朗, 中南民族大学	四元全赫斯勒合金 $\text{HfCoCrAl}$ 的第一性原理研究
M-P032	孙月梅, 江苏理工学院	氢在钯金属表面吸附扩散过程的机理研究

M-P033	张丽莹, 郑州大学	Kinetic pathways towards mass production of single crystalline stanene on topological insulator substrates
M-P034	Xizhi Shi, Xiangtan University	New carbon allotropes identified in stochastic group and graph constrained searches by RG2 code
M-P035	Chunxiang Zhao, Zhengzhou university	Structural, Topological, and Superconducting Properties of Two-Dimensional Tellurium Allotropes from ab initio predictions
M-P036	孔敏, 桂林理工大学	第一性原理研究 T1 相的腐蚀机理
M-P037	Chunyan Wang, Zhengzhou university	Low Frequency Acoustic Phonon Enhanced Negative Thermal Expansion in $MII_2[MIV(CN)_8]$ ( $MII=Ni, Co, Fe, Mn$ ; $MIV=Mo, W$ ) from Ab Initio Calculations
M-P038	Chaowei Xu, Tongji University	Thermal Tuning of Acoustic Manipulation by a Ferroelectric Phononic Crystal Plate
M-P039	顾琴燕, 南京大学	Superconducting Single-Layer T-Graphene and Novel Synthesis Routes
M-P040	Kang Xia, Nanjing University	Pressure-Stabilized High-Energy-Density Alkaline-Earth-Metal Pentazolate Salts
M-P041	Cong Liu, Nanjing University	Multiple superionic states in helium-water compounds
M-P042	吴珏霏, 南京大学	Ground states of $Au_2Pb$ and pressure-enhanced superconductivity
M-P043	Hao Gao, Nanjing University	Improve the performance of machine-learning potentials by optimizing descriptors
M-P044	王亚南, 中国科学院	二氧化钛界面光生载流子激发态动力学
M-P045	Liang Ma, Jilin University	High-pressure study of the structural phase transition in $Cu_{1.875}Te$
M-P046	ZheWang, Fudan University	Hydrogen as a source of flux noise in SQUIDS
M-P047	裴森, 北京应用物理与计算数学研究所	双色光照射下石墨烯三阶响应的椭圆率依赖研究
M-P048	廉朝胜, 郑州大学	Coexistence of Superconductivity with Enhanced Charge Density Wave Order in the Two-Dimensional Limit of $TaSe_2$
M-P049	王飞, 郑州大学	A type-II $C_2N/\alpha$ -Te van der Waals heterojunction with improved optical properties by external perturbation
M-P050	苏志鑫, 郑州大学	Monolayer $MoS_2$ Adsorbed on Transition Metal substrate for Highly Efficient Single-Atom Catalysis of CO Oxidation design
M-P051	P. J. Zuo, Fudan University	Large Magnetic Anisotropy Energy and Valley Splitting Energy of Single Transition Metal Ad-atoms on Monolayer $WS_2$
M-P052	姜新新, 山东大学	Spin-polarized current in wide bandgap hexagonal boron nitrides containing 48 line defects

M-P053	曹国花, 中国科学技术大学	Data-driven descriptor for high-throughput screening of topological insulators
M-P054	Xin Yang, Jilin University	Pressure-induced decomposition of binary lanthanum intermetallic compounds
M-P055	郑淇蓉, 中科院合肥物质科学研究院	中子辐照下材料损伤的跨尺度动力学模拟
M-P056	陆鹏超, 南京大学	Robust double Weyl semimetal phase in nonmagnetic hexagonal lattice system
M-P057	廖培山, 郑州大学	吡咯并吡咯二酮/低聚噻吩共聚物光电性质第一性原理研究
M-P058	孙京格, 郑州大学	Unusual tribology behaviors of Ferroelectric two-dimensional $\text{In}_2\text{Se}_3$ material
M-P059	任梦茹, 郑州大学	First-principles Calculations on the Catalytic Properties of Fe SingleAtom Stabilized on Honeycomb Borene/ $\text{Al}(111)$
M-P060	贾雷, 兰州大学	通过高次谐波来区分 4 种 $\text{MoS}_2$ 的晶体相
M-P061	高涵, 山东大学	Tunable Broadband Hyperbolic Light Dispersion in Metal Diborides
M-P062	时俊杰, 郑州大学	First-Principles Study on the Structure and Magnetic Properties of Two-Dimensional Ferrite
M-P063	Wenqing Zhang, Shandong University	Molybdenum selenide type nanowires as efficient catalyst for bi-functional oxygen evolution/reduction reactions
M-P064	孙雷, 山东大学	工业畸变下 Ruby 晶格狄拉克锥的鲁棒性
M-P065	官雨柔, 昆明理工大学	过渡金属修饰手性边缘石墨烯纳米带磁性的第一性原理研究
M-P066	冯旭坤, 山东大学	二维铁电材料 $\text{Sc}_2\text{P}_2\text{Se}_6$ 及磁性掺杂诱发的多铁性
M-P067	张雯丽, 郑州大学	Tunable electronic properties of 2D a-tellurene-based bilayer and trilayer heterostructures
M-P068	陈东, 河南大学	铁电极化对 $\text{X}_3\text{GeTe}_2/\text{In}_2\text{Se}_3$ ( $\text{X}=\text{Fe}, \text{Mn}, \text{Ni}$ ) 异质结磁性的调控研究
M-P069	李静玉, 河南大学	第一性原理研究 $\text{Co}_2\text{FeAl}/\text{MgO}/\text{Co}_2\text{FeAl}$ 多层材料的与磁相关的塞贝克效应
M-P070	王文轩, 河南大学	稀土铁氧体 $\text{AFeO}_3$ ( $\text{A}=\text{Lu}, \text{Y}, \text{和 Gd}$ ) 中磁畴壁诱导铁电极化的第一性原理研究
M-P071	孙伟, 河南大学	钙钛矿氧化物异质结中极化对磁性的调控
M-P072	杨国春, 东北师范大学	$\text{Li}_6\text{P}$ 电子化合物超导电性的理论研究
M-P073	彭枫, 洛阳师范学院	典型功能材料的高压理论设计

M-P074	沈宇皓, 华东师范大学	Chirality dependent dielectricity in Moiré antiferromagnet
M-P075	张毛毛, 山东大学	有机光电器件内非均匀电场驱动的激发态超快运输
M-P076	蒋卫卿, 广西大学	Mg 掺杂 $\text{LiBH}_4$ 与 $\text{Li}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$ 放氢性能的第一性原理研究
M-P077	卢秋霞, 山东大学	有机聚合物中交换耦合作用诱导的自旋运输
M-P078	沈鹏超, 郑州大学	氧族元素对 D-A 共聚物电子结构和光吸收谱影响的第一性原理研究
M-P079	王家宝, 北京师范大学	键无序对 $\pi$ 通量正方晶格基态反铁磁性的影响
M-P080	高腾, 山东大学	有机半导体中热诱导激子扩散和解离
M-P081	李依, 河南师范大学	网格状单层 $\text{MoTe}_2$ 的电子结构和磁学性质
M-P082	李冲, 山东大学	给/受体界面处聚合物非均匀堆叠驱动的电荷转移, 弛豫和分离动力学
M-P083	刘鹏飞, 中国科学院高能物理研究所东莞分部	新型二维硒化物热电材料的第一性原理研究
M-P084	汪瑜, 成都理工大学	氧气在铀金属表面上分解过程的从头算分子动力学方法的研究
M-P085	刘亮亮, 河南大学	理论预言顺磁电子晶体 $\text{Y}_2\text{C}$ 中存在 Weyl 费米子
M-P086	潘伟, 华东师范大学	哈密顿矩阵的基态普适关系及其应用
M-P087	胡啸, 华东师范大学	利用机器学习方法寻找 Heusler 合金中的高自旋极化铁磁材料
M-P088	李林山, 成都理工大学	压缩和拉伸条件下 $\text{CeO}_2$ 多晶型和相变的第一性原理计算
M-P089	史金磊, 北京计算科学研究中心	Unconventional Deformation Potential and Half-Metallicity in Zigzag Nanoribbons of 2D-Xenes and Group-IV Binary Compounds
M-P090	张玉东, 郑州大学	非平衡流和多相流的离散 Boltzmann 建模与模拟
M-P091	张婷, 山东大学	通过铁弹性控制二维 $\alpha$ -MPI ( $M = \text{Zr}, \text{Hf}$ ) 中各向异性电子行为的方向
M-P092	徐熙龙, 山东大学	单层 $\text{Tl}_2\text{O}$ 中非金属原子掺杂产生的谷极化
M-P093	彭瑞, 山东大学	单层 $\text{Ag}_2\text{S}$ : 二维双向拉胀材料
M-P094	王晓春, 吉林大学	仿生材料在氢能源中的应用
M-P095	蒋元祺, 南昌师范学院	Cu-Zr 二十面体团簇(以 Cu 为中心)化学序与其本征物性间的关联



M-P096	张喜林, 河南师范大学	Trifunctional CoN <sub>x</sub> embedded graphene electrocatalysts for OER, HER and ORR
M-P097	钟汨, 西南交通大学	A first-principles study on the unrevealed electronic and optical properties of the LaAgOS-type copper oxychalcogenides
M-P098	高炎, 中国人民大学	Graphyne: 拥有丰富光电及拓扑性质的低能碳同素异形体系族
M-P099	申世英, 山东大学	单层 $\gamma$ -SbP 和 $\gamma$ -SbAs 中的二维铁电性
M-P100	何新玲, 南开大学	预测基态钠硼化合物
M-P101	刘静毅, 北京工业大学	层状外延多铁性复合薄膜电磁性能的数值模拟
M-P102	方秀秀, 河南师范大学	基于第一性原理计算的银过饱和掺杂晶体硅的原子结构与光学性质
M-P103	孟冬雪, 湖北大学	ZnO 基四元合金的电子结构和热力学性质理论研究
M-P104	Cai-juan Xia , Xi'an Polytechnic University	Effect of C2N-h2D Electrodes on the Rectifying Effects of Diblock Co-Oligomer Molecule Devices
M-P105	Feng Xue , Fudan University	Designing Perpendicular Two-dimensional Ferromagnetism in van der Waals Magnet CrCl3 Monolayer
M-P106	许少文, 上海大学	The interplay of electronic, magnetic and structural properties of GdB <sub>6</sub> from first principles
M-P107	任海超, 中国工程物理研究院	磷酸胆碱在电场作用下的二维红外光谱图研究
M-P108	刘新根, 上海大学	Vertical ferroelectric switching by in-plane sliding of two-dimensional bilayer WTe <sub>2</sub>
M-P109	徐志涛, 新奥科技发展有限公司	基于磁通环数据重建等离子体电流分布的研究
M-P110	吴强华, 清华大学	用“约化 R-矩阵”模型研究质子-质子散射积分截面
M-P111	Binhua Zhang , Fudan University	Effect of Structural Disordering on Magnetic and Magneto-optical Properties of Fe <sub>3</sub> Si
M-P112	过伊吕, 东南大学	基于范德华铁磁半导体异质结构的可逆逻辑磁光控制设计
M-P113	张喜雯, 东南大学	二维本征高温铁磁半金属 Cr <sub>3</sub> X <sub>4</sub> (X= S, Se, Te) 的第一性原理预测
M-P114	潘洪哲, 临沂大学	单层 C <sub>4</sub> N <sub>3</sub> H: 一种二维有机狄拉克体系的结构设计及物性研究
M-P115	唐俊宇, 中国科学技术大学	Two-dimensional half-metallic ferromagnets: FeCl <sub>2</sub> and MnSe <sub>2</sub>